Prof. Holger Stark (Sprechstunde: Fr 11:30-12:30 in EW 709)
Dr. Johannes Blaschke (Sprechstunde: Mi 10:00-11:00 in EW 708)

13. Übungsblatt – Statistische Physik

Abgabe/Vorrechnen: Mo. 06.02.2017 im Tutorium (12:15 - 13:45 EW 731)

M **Aufgabe 36**: *Landauentwicklung einer binären Mischung I*

Eine Legierung (z.B. Messing) bestehe aus N_A Atomen des Typs A und N_B Atomen des Typs B, stellt also eine sog. binäre Mischung dar. Die Atome sind in einem kubischen primitiven Gitter angeordnet und wechselwirken nur mit ihren 6 nächsten Nachbarn. Die Wechselwirkungsenergie hat den Wert $-J$ (anziehend) zwischen gleichen Atomen ($A-A$ und $B-B$) und den Wert $+J$ (abstoßend) zwischen verschiedenen Atomen ($A-B$). Es gilt $J>0$.

(a) Bei festen N_A und N_B, in welcher Konfiguration ist die Energie minimal?

(b) Berechnen Sie die Gesamtwechselwirkungsenergie U unter der Annahme, dass die Atome zufällig auf N Plätzen ohne Korrelationen verteilt sind.

Hinweis: Betrachten Sie wie oft die verschiedene Verbindungsarten (z.B. $A-B$) auftreten können, und welchen Beitrag diese zur Gesamtenergie liefern.

S **Aufgabe 37 (4 Punkte):** *Landauentwicklung einer binären Mischung II*

(a) Berechnen Sie die Mischungsentropie S unter der Annahme $N_A, N_B \gg 1$. Verwenden Sie die Stirlingformel $\ln N! \approx N \ln N - N$.

(b) Berechnen Sie die Freie Energiedichte $f = F/N = (U-TS)/N$ als Funktion des Ordnungsparameters $\phi \equiv (N_A - N_B)/N$ mit der Wechselwirkungsenergie U aus Aufgabe 36. Entwickeln Sie $f(\phi)$ bis zur vierten Ordnung in ϕ:

$$f(\phi) \approx a_0(T) + \frac{a_2(T)}{2}\phi^2 + \frac{a_4(T)}{4}\phi^4 \,.$$

Solch eine Entwicklung nennt man Landauentwicklung. Zeigen Sie, dass $f(\phi)$ unterhalb einer kritischen Temperatur T_c nicht mehr überall konvex ist und skizzieren Sie $f(\phi)$ für $T > T_c$, $T = T_c$, $T < T_c$ und $T = 0$.

Rechnen Sie im folgenden mit der genäherten freien Energiedichte weiter.

(c) Bestimmen Sie die sogenannte Spinodale $\phi_{sp}(T)$. Diese begrenzt den Bereich $\phi < |\phi_{sp}(T)|$, in dem $f(\phi)$ für $T < T_c$ nicht konvex ist. Dieser Bereich ist charakterisiert durch eine Phasenseparation in von A bzw. B Atomen dominierte Bereiche mit $\phi = \pm\phi_{eq}(T)$, wobei $\pm\phi_{eq}(T)$ die freie Energiedichte $f(\phi)$ minimiert. Bestimmen Sie $\phi_{eq}(T)$. Zeichnen Sie $\pm\phi_{eq}(T)$ und $\pm\phi_{sp}(T)$ in ein (T,ϕ) Diagramm ein. Berechnen Sie den kritischen Exponenten β (siehe Aufgabe 32 (d)).

S **Aufgabe 38 (6 Punkte):** *Ginzburg-Landau Theorie*

Für allgemeine inhomogene Systeme im Nichtgleichgewicht, d.h. solche mit orts- und zeitabhängigem Ordnungsparameter $\phi(\mathbf{r},t)$, wird die Freie Energie zu einem Funktional verallgemeinert:

$$F[\phi(\mathbf{r},t)] = \int d^3\mathbf{r} \left\{ f(\phi) + \frac{\gamma}{2}(\nabla\phi)^2 \right\}.$$

mit der Landauentwicklung $f(\phi)$ aus Aufgabe 37. Der Term $\frac{\gamma}{2}(\nabla\phi)^2$ mit $\gamma > 0$ berücksichtigt Inhomogenitäten von ϕ.

(a) Die Variation von F beschreibt nun die Energieänderung, wenn Atome (oder i.A. Teilchen) die Position ändern. Wir fassen diese Änderung daher als chemisches Potential auf mit $\mu = \frac{\delta F}{\delta \phi}$. Zeigen Sie, dass man zusammen mit dem 1. Fick'schen Gesetz $\mathbf{j} = -D\nabla\mu$ und der Kontinuitätsgleichung zur sog. Cahn-Hilliard Gleichung gelangt:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D\nabla^2 \left[a_2\phi + a_4\phi^3 - \gamma\nabla^2\phi\right] \ .$$

Hinweis: Die Variationsableitung ist definiert über $\int \frac{\delta F}{\delta \phi}\delta\phi\, d^3\mathbf{r} = \frac{d}{d\epsilon}F[\phi + \epsilon\delta\phi]\big|_{\epsilon=0}$. Verwenden Sie außerdem die partielle Integration im Volumen: $\int_V \nabla w \cdot \mathbf{v}\, d^3\mathbf{r} = \int_{\partial V} w\ \mathbf{v}\cdot d\mathbf{S} - \int_V w\, \boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v}\, d^3\mathbf{r}$.

(b) Linearisieren Sie die Cahn-Hilliard Gleichung für den Fall niedriger Temperaturen (d.h. Phasenseparation) und machen Sie die Gleichung dimensionslos mit $\frac{\partial}{\partial t} \to \frac{1}{\tau}\frac{\partial}{\partial \tilde{t}}$ und $\nabla^n \to \frac{1}{\lambda^n}\nabla^n_{\tilde{x}}$. Die resultierende Gleichung sollte lauten:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tilde{t}} = -\nabla^2_{\tilde{x}}\left[3\phi + \nabla^2_{\tilde{x}}\phi\right] \ .$$

Geben Sie τ und λ an.

(c) Geben Sie die Fourier-transformierte ($\tilde{x} \to k$) der linearisierten Cahn-Hilliard Gleichung an. Störungen welcher Wellenlänge (im k-Raum) werden gedämpft, welche verstärkt? Für welche Wellenlänge ist die Verstärkung maximal?